Index

Commentationes et Relationes

Akazawa, H., s. Yamakawa, M., et al. 244
Ake, R. L., and M. Gouterman: Porphyrins XIV. Theory for the Luminescent State in VO, Co, Cu Complexes 20
Allinger, N. L., s. Tai, J. C. 133
Armstrong, D. R., and P. G. Perkins: The Electronic Structure of Boron Trifluoride . 413

Basilevsky, M. V., and I. E. Chlenov: A Semi-Empirical Calculation of the Potential Surface for the $CH_3 + CH_2 = CH_2$ Reaction 174
Berthod, H., s. Pullman, B. 205
— s. Pullman, B., et al. 265
Bonaccorsi, R., C. Petrongolo, E. Scrocco, and J. Tomasi: Configuration-Interaction Calculations for the Ground State of OF_2, NO_2^-, CN^-: Canonical Orbitals and Exclusive Orbitals 332
Burnelle, L. A., s. Schaad, L. J., et al. 91

Chlenov, I. E., s. Basilevsky, M. V. 174
Clark, D. T.: Non Empirical LCAO-MO-SCF Calculations with Gaussian Type Functions on Some Three Membered Ring Heterocycles. II. Energies and Population Analysis . 225

Diner, S., J. P. Malrieu, F. Jordan, and M. Gilbert: Localized Bond Orbitals and the Correlation Problem. III. Energy up to the Third-Order in the Zero-Differential Overlap Approximation. Application to σ-Electron Systems 100
Doggett, G.: Atomic Valence States in Molecular Orbital Theory 344
Dressler, K. P., s. Schaad, L. J., et al. 91
Dreyfus, M., s. Pullman, B., et al. 265

Gilbert, M., s. Diner, S., et al. 100
— s. Jordan, F., et al. 211
Golding, R. M., F. Jackson, and E. Sinn: The Strengths of Bonding and Degree of Distortion from Octahedral Symmetry by Mössbauer Spectroscopy 123
Goodisman, J.: On the Partitioning of Energy for Atoms, Ions, and Molecules 165
Gouterman, M., s. Ake, R. L. 20

Hagan, B. J., s. Lielmezs, J. 89
Hartmann, H., u. D. Hendel: Deutung der K_α-Satelliten bei leichten Elementen . . . 303
— — Chemische Verschiebung der Röntgen-Sauerstoff-K_α-Linien in den relativ polaren Oxiden BaO, SrO, CaO und MgO 311
Hegyi, M. G., M. Mezei, and T. Szondy: Determination of Molecular Properties by the Method of Moments. I 273
— — — Determination of Molecular Properties by the Method of Moments. II . . . 283
Hendel, D., s. Hartmann, H. 303
— s. Hartmann, H. 311
Hendrickson, D. N., and P. M. Kuznesof: CNDO Calculations: Electronic Spectra and Nitrogen-14 N. M. R. Shielding Constants for Some Small Nitrogen Ions. 57
Hoffmann, F.: LCAO-MO-SCF-Indizes chemischer Reaktionsfähigkeit und krebserregende Eigenschaft polyzyklischer Kohlenwasserstoffe 393
Hoyland, J. R., and L. B. Kier: Semiempirical Quantum Mechanical Studies on Some Hydrogen Bonded Systems 1
Huzinaga, S.: Some Calculations on the Ethylene Molecule 12

Pagina

JACKSON, F., s. GOLDING, R. M., et al. 123
JORDAN, F., M. GILBERT, J. P. MALRIEU, and U. PINCELLI: Localized Bond Orbitals and the Correlation Problem. IV. Stability of the Perturbation Energies with Respect to Bond Hybridization and Polarity 211
— s. DINER, S., et al. 100

KIER, L. B., s. HOYLAND, R. 1
KLESSINGER, M.: Gaussian Expansions of Minimal STO Basis for Calculations in Molecular Quantum Mechanics 353
KRAMLING, R. W., and E. L. WAGNER: The Electronic Structures of Urazole, Pyrrole, and Their Ions. The σ-π Separability Problem 43
KRUGLYAK, Y. A., and E. V. MOZDOR: Study of the Electronic Structure of Radicals by the CI Method. 2. Ground State of the Benzyl Radical 365
— — Study of the Electronic Structure of Radicals by the CI Method. 3. Excited States of the Benzyl Radical 374
KUBOTA, T., s. YAMAKAWA, M., et al. 244
KUZNESOF, P. M., s. HENDRICKSON, D. N. 57

LIELMEZS, J., and B. J. HAGAN: Relation between Torsional Frequency and Ionization Potential of Substituent Atoms in 1-Fluoro-2-Haloethanes and Allyl Halides 89
LIN, C. S.: Analysis of the Natural Spin Orbitals of the Three-Electron System: Lithium Hydride Molecule Ion 73
LINNETT, J. W., and A. RIERA: The Wave Functions of H_2 and Symmetrical Linear H_3 . 196
— s. RIERA, A. 181

MALRIEU, J. P., s. DINER, S., et al. 100
— s. JORDAN, F., et al. 211
MANTIONE, M. J.: Van der Waals Interactions in Molecular Complexes of Tetracyanoethylene 141
MATAGA, N., and O. TANIMOTO: Possible Mechanisms of Intermolecular Charge Transfer and Electron Transfer Processes in the Excited Electronic State 111
McALOON, B. J., and B. C. WEBSTER: A Molecular Orbital Study of a Dimer Model for the Hydrated and the Ammoniated Electron 385
MEZEI, M., s. HEGYI, M. G., et al. 273
— s. HEGYI, M. G., et al. 283
MICHL, J.: Effects of Inductive Substituents on Electronic Spectra. Aza Analogs of Fluoranthene 315
MOZDOR, E. V., s. KRUGLYAK, Y. A. 365
— s. KRUGLYAK, Y. A. 374

NECKEL, A., s. SCHWARZ, K., et al. 149

PERKINS, P. G., s. ARMSTRONG, D. R. 413
PETRONGOLO, C., s. BONACCORSI, R., et al. 332
PINCELLI, U., s. JORDAN, F., et al. 211
PULLMAN, B., and H. BERTHOD: Tautomerism in Isomeric Oxypurines 205
— —, and M. DREYFUS: Amine-Imine Tautomerism in Adenines 265

RIERA, A., and J. W. LINNETT: *Ab initio* Calculation on the H_3 Activated Complex . . 181
— s. LINNETT, J. W. 196
ROBERTS, G., and K. D. WARREN: SCF-π-Electron Calculations Using Orthogonalised Atomic Orbitals. III. An Approach to Non-Empirical Calculations 293
ROBERTS, H. G. FF.: Uncoupled Hartree-Fock Calculations of the Ring Current Contribution to the Chemical Shifts in Conjugated Hydrocarbons 63

Pagina

SCHAAD, L. J., L. A. BURNELLE, and K. P. DRESSLER: The Excited States of Allene . . . 91
SCHWARZ, K., P. WEINBERGER, u. A. NECKEL: Berechnung der Bandstruktur von ScC und ScN . . . 149
SCHWARZ, W. H. E.: Die Alkalimetallmoleküle nach dem Kombinierten Näherungsverfahren (KN) . . . 235
SCROCCO, E., s. BONACCORSI, R., et al. . . . 332
SINN, E., s. GOLDING, R. M., et al. . . . 123
SZONDY, T., s. HEGYI, M. G., et al. . . . 273
— s. HEGYI, M. G., et al. . . . 283

TANIMOTO, O., s. MATAGA, N. . . . 111
TOMASI, J., s. BONACCORSI, R., et al. . . . 332
TAI, J. C., and N. L. ALLINGER: Application of the VESCF Method to Calculation of the Electronic Spectra of Pyridine, Pyrrole, and Furan . . . 133

WAGNER, E. L., s. KRAMLING, R. W. . . . 43
WARREN, K. D., s. ROBERTS, G. . . . 293
WEBSTER, B. C., s. MCALOON, B. J. . . . 385
WEINBERGER, P., s. SCHWARZ, K., et al. . . . 149

YAMAKAWA, M., T. KUBOTA, and H. AKAZAWA: Electronic Structures of Aromatic Amine N-Oxides . . . 244

ZEECK, E.: Zur Deutung des Einflusses von Siliziumsubstituenten auf das Spektrum konjugierter Kohlenwasserstoffe . . . 86

Recensiones

Annals of the New York Academy of Sciences, Vol. 158 (Ref. G. RESKE) . . . 269

GOLDING, R. M.: Applied Wave Mechanics (Ref. E. A. REINSCH) . . . 270

Erratum

GREIN, F., and T.-J. TSENG: Correlated One-Center Wavefunctions for Two-Electron Molecules. II. Configuration-Interaction Functions and Application to HeH^+ . . . 271

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 5 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît aux courts intervalles, dans le mesure des articles reçus. En générale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscript accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 15

Index

Fasc. 5

KRUGLYAK, Y. A., and E. V. MOZDOR: Study of the Electronic Structure of Radicals by the CI Method. 2. Ground State of the Benzyl Radical 365

KRUGLYAK, Y. A., and E. V. MOZDOR: Study of the Electronic Structure of Radicals by the CI Method. 3. Excited States of the Benzyl Radical 374

MCALOON, B. J., and B. C. WEBSTER: A Molecular Orbital Study of a Dimer Model for the Hydrated and the Ammoniated Electron 385

HOFFMANN, F.: LCAO-MO-SCF-Indizes chemischer Reaktionsfähigkeit und krebserregende Eigenschaft polyzyklischer Kohlenwasserstoffe 393

LCAO-MO-SCF *Indices of Chemical Reactivity and Carcinogenic Activity of Polycyclic Hydrocarbons*

ARMSTRONG, D. R., and P. G. PERKINS: The Electronic Structure of Boron Trifluoride . 413

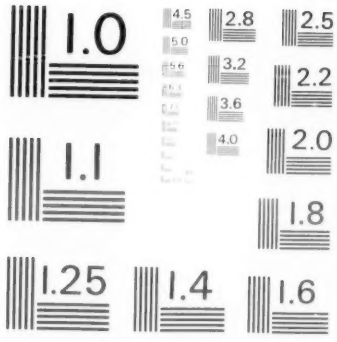
Indexed in Current Contents

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3

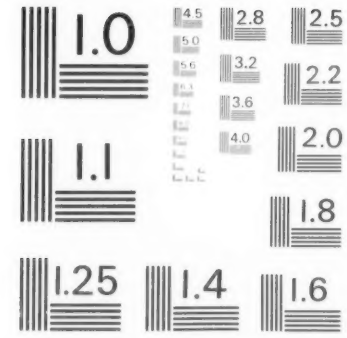
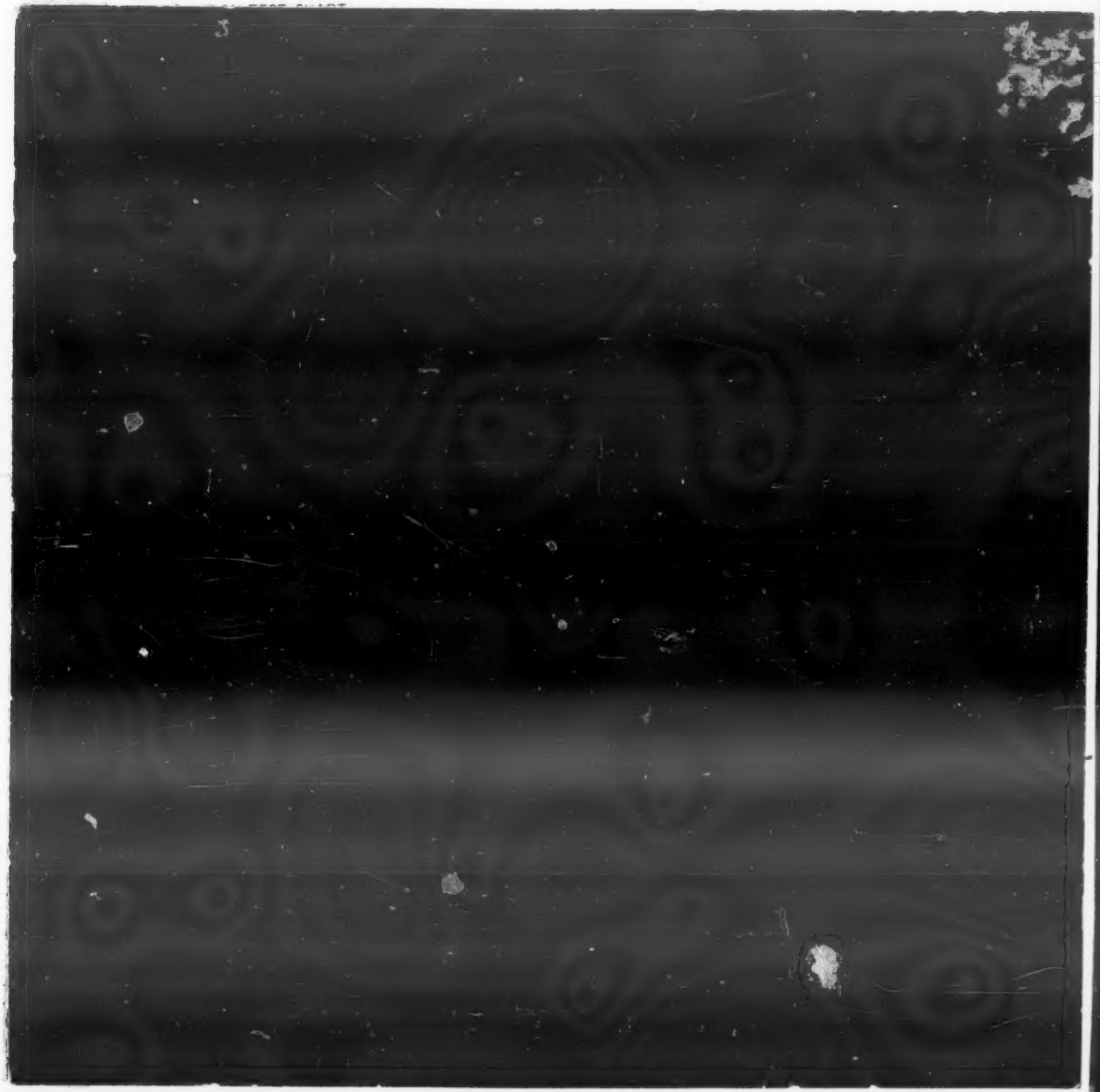
Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

Printed in Germany — Copyright © by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1969



MICROCOPY RESOLUTION TEST CHART
NATIONAL BUREAU OF STANDARDS - 1963 - A


1.0
4.5
5.0
5.6
6.3
2.8
3.2
3.6
4.0
2.5
2.2
2.0
1.8
1.1
1.25
1.4
1.6